

龙冉——未来三年研究计划

总体目标:

基于金属等离子激元的分子活化调控

研究背景:

催化是众多应用领域发展的关键，其目标是实现高效且定向的化学转化。很多反应的关键在于分子的吸附与活化。金属等离子激元所激发的热电子可以注入到反应分子的反键轨道，改变反应的进程，从而实现催化活性的调控，这一机制可能对于部分化学键的断裂起到关键的作用，从而提高催化活性。然而这种模式下的热电子只能更大概率地注入到费米面附近的轨道中，对于反应的选择性调控能力是有限的。所以针对选择性要求更高的体系，我们需要开发新的反应机制，例如界面耦合分子激发活化，金属与吸附分子轨道杂化后，在等离子激元的作用下进行集体激发，这就有可能通过激发能量的调控使得集体振荡的热电子激发到特定的轨道中，从而实现反应的高选择性。

研究内容:

- 1) 在先前工作基础上，在调控催化位点和吸光单元参数的同时，基于同步辐射技术，着重精准控制等离子激元催化材料的界面结构和维度。
- 2) 以所得材料为模型体系，结合同步辐射技术、拉曼光谱等谱学手段，在分子和电子水平上研究其物理与化学过程，建立相应的构效关

系，从而可以针对特定的反应来定向设计固体材料。

工作方式：

依托国家同步辐射实验室、中国科学技术大学应用化学系的研究条件和基础设施开展研究；同时紧密保持与合肥微尺度物质科学国家中心、合肥物质研究院等大科学平台的合作，推进项目顺利完成。

预期成果：

研究成果将以论文形式呈现，预计在化学、材料、能源类期刊发表论文 6-10 篇；申请发明专利 1-2 项。